ブラウン運動論と量子力学（Ⅳ）

佐賀大・理工・化学　竹　山　尚　賢

（１１月６日受理）

設問；何故にブラウン運動論を？

〔Ans.1〕　ブラウン運動論におけるE－S過程とSchrödinger 方程式との間に，$D=\hbar/2m$ の対応関係のもとで完全な対応が成立し，かつ前者にはE－S過程のsub-level に，O－U過程が存在し，従って，波動方程式の sub-level が対応論的に見出せるかもしれない。本シリーズ（Ⅰ）参照。

〔Ans.2〕　量子力学自体の内に"拡散の運動エネルギー"を要求する因子がある。本シリーズ（Ⅲ）で少し顔を出した問題と連関する。一般的な形で指摘すると，次の様になり公知の事柄に属する。

$$\langle E\rangle \equiv \int \varphi H \varphi d\tau$$
$$=\int\left\{-(\hbar^2/2m)\varphi\triangle\varphi+U\varphi^2\right\}d\tau\ , \qquad (1)$$

を問題にしよう。φはreal としておく。

$$\varphi\triangle\varphi=\mathrm{div}(\varphi\nabla\varphi)-(\nabla\varphi)^2 \qquad (1\cdot a)$$

であり，全空間の体積積分で右辺第１項はGauss の定理により無限遠の閉じた曲面にわたる表面積分となり，φが無限遠で消えることにより，結局

$$\int \mathrm{div}\ (\varphi\nabla\varphi)\ d\tau=0\ , \qquad (1\cdot b)$$

従って（１）は，次式となる。

$$\langle E\rangle=\int\left\{\hbar^2/2m)(\nabla\varphi)^2+U\varphi^2\right\}d\tau\ , \qquad (2)$$

この右辺第１項は確かに運動エネルギーの期待値に由来するが，しかし，これ自体としては何者であろうか？　一般に固有値について

$$E_n > U_{min}\quad (=U\text{の最小値}) \qquad (3)$$

であり，理由は運動エネルギーの期待値が$\langle K\rangle>0$であるからである。

いま変分原理とのかね合いて，基底状態 $(n=0)$ を考えてみると，

$$\langle E\rangle=\text{最小} \qquad (4\cdot a)$$

を主条件とし，規格化条件を補助条件とするとき，Lagrange乗数として固有値 E_0，対応するφとしてφ_0 が求まる。すなわち，$\delta\langle E\rangle=0$より，$\int\varphi^2 d\tau$

＝１のもとで

$$\delta\int\{(\hbar^2/2m)(\nabla\varphi)^2\}d\tau+\delta\int U\varphi^2\,d\tau=0 \qquad (4\cdot b)$$

系はその基底状態において$\langle U\rangle min$に向って集ろうとするが，その傾向をさまたげる方向に拡散が起り，両者のかね合いの上に$\varphi_0{}^2$の定常分布が成立することとなろう。ポテンシヤルの深みを求める傾向が力学的とすると，確率密度の局在化をさまたげる濃密度部分から稀薄密度部分への拡散が，ブラウン運動論的傾向であろう。後者の因子は，運動エネルギーの項に由来するが，そのものではない。(2)の右辺第１項

$$\int(\hbar^2/2m)(\nabla\varphi/\varphi)^2\varphi^2\,d\tau$$
$$=\int(\hbar^2/2m)(\nabla\ell n\varphi)^2\varphi^2\,d\tau$$

において，

$$\left.\begin{aligned}\ell n\varphi&=R/\hbar\\ \nabla R&=m\vec{u}\end{aligned}\right\}\qquad(5)$$

によって拡散速度$\vec{u}$を導入すると，上述の変分（4・b)は，$\int\varphi^2\,d\tau=1$のもとで

$$\delta\int\{(m/2)u^2\varphi^2\}d\tau+\delta\int U\varphi^2\,d\tau=0 \qquad (6)$$

となり，正に拡散流の平均運動エネルギーが$U min$を求める傾向と均合うものと考えられる。密度が局所に集中しすぎてまずい理由は"自己エネルギー"が高くなりすぎて定常たりえなくなるものと考えてよいであろう。

ここで一般に，(5)のもとで

$$(\hbar^2/2m)\int div(\varphi\nabla\varphi)\,d\tau$$
$$=(\hbar/2)\int div(\vec{u}\varphi^2)\,d\tau=0, \qquad (7)$$

であることが注意される。これは$\rho=\varphi^2$の問題となる空間域Ωにおいて積分値$\int_\Omega\rho\,d\tau$が有限に止まるべきことの為に要請されるφへの条件，Ωの外域で零となることによるが，Ωの界面Σから拡散していく流れ密度$u\rho$の全量$\int_\Sigma\vec{u}\rho\cdot\vec{n}\,ds$，($ds$は$\Sigma$上の面積素片，$\vec{n}$は$\Sigma$上の外向き法線方向の単位ベクトル)，すなわち$\int_\Omega div\vec{u}\rho\,d\tau$を消してしまうこと，あるいは局所的に，

$$\partial\rho/\partial t=-div(\vec{u}\rho)=0, \qquad (8)$$

の強い連続の式の成立を意味する。これが定常状態の成立を支えているとみられるが，もともと連続の式はφの位相因子Sからの力学的速度$\vec{v}=\nabla S/m$の密

度との間に成立していたのであり，これも(8)から，

$$\partial \rho / \partial t = -\mathrm{div}\ (\vec{v}\rho) = 0$$

となる。この意味で，定常状態では$\vec{u}$と$\vec{v}$との区別が必要でなく，とくにφを実数としたことにより，位相Sが表面にでることはない。従って$\vec{v}$もまた表面にでることはない。$\vec{u}$の導入が不可避であるといって過言ではなかろう。

設問；定常波動方程式

$$-(\hbar^2/2m)\triangle\varphi + U\varphi = E\varphi \tag{10}$$

の成立は，Hamilton-Jacobi 式との関連のもとで，どのように考えられるのであろうか？

対応するH－Jの式は作用積分Sに対する

$$\partial S/\partial t + (1/2m)\ (\nabla S)^2 + U = 0 \tag{11}$$

であるが，簡約された作用積分をRとして

$$\left.\begin{aligned} &S = -Et + R, \\ &R = \hbar \ell n \varphi \end{aligned}\right\} \tag{11・a}$$

ととり，(11)に代入し次式がえられる。

$$(\hbar^2/2m)\ (\nabla\varphi)^2 - (E-U)\ \varphi^2 = 0 \tag{11・b}$$

これの空間積分をとり，その値を極値とする無条件変分

$$\delta \int \{\ (\hbar^2/2m)\ (\nabla\varphi)^2 - (E-U)\ \varphi^2\ \} d\tau = 0 \tag{11・c}$$

により，固有値方程式として

$$-(\hbar^2/2m)\triangle\varphi + U\varphi = E\varphi$$

が生ずる。(11・a)によって導入されたRすなわち波動関数$\varphi = \exp(R/\hbar)$が(5)と同等であり，エネルギー保存則が成立する運動，$H(p, q) = E =$ 一定，に対しては，

$$\nabla S = m\vec{v} = \nabla R = m\vec{u}$$

従って，$\vec{v} = \vec{u}$である。

(11・a)に代り，時間のみの関数

$$\tilde{S}(t) = -Et\ (= \mathrm{real}) \tag{12・a}$$

を純虚数部分にとり，

$$\hbar \ell n \varphi = R + i\tilde{S}(t) \tag{12・b}$$

によって波動関数φを導入することにより，

$$E\varphi = H\varphi = i\hbar\,\partial\varphi/\partial t \tag{12}$$

が成立することとなる。このとき，（１２・ａ）を虚数部分にとることに対して古典論内部における正当化はできない（波動光学との対応なしには／）。ただし，後節〔Ⅳ〕参照。

設問；時間に依存する波動方程式(12)に対し，Ｒ，Ｓともに実数として，

$$\hbar\,\ell n\varphi = R + iS \tag{13}$$

とおいてえられる次式の組から，特殊な場合として諸々の運動状態が現われる。

$$\partial S/\partial t = -(1/2m)(\nabla S)^2 - U + (1/2m)(\nabla R)^2 + (\hbar/2m)\triangle R, \tag{13・a}$$

$$\partial R/\partial t = -(1/m)\nabla S\cdot\nabla R - (\hbar/2m)\triangle S \tag{13・b}$$

どのような条件下に　どのような運動状態が現われるのであろうか？

〔Ⅰ〕

$$\left.\begin{aligned}\partial R/\partial t &= -(\nabla S/m)\cdot\nabla R\\ &= -\dot{Q}(t)\cdot\nabla R,\\ \partial\nabla S/\partial t &= m\ddot{Q}(t) = 0\end{aligned}\right\} \tag{14}$$

で下では，（１３・ｂ）から$\triangle S = m\,\mathrm{div}\,\dot{Q}(t) = 0$が成立し，換言すれば，

$$\left.\begin{aligned}R &= R(q - Q(t)),\\ \dot{Q}(t) &= \vec{V} = \nabla S/m\end{aligned}\right\} \tag{14'}$$

の場合である。作用関数Ｓの簡約化ができて

$$S = m\dot{Q}(t)\cdot q + \tilde{S}(t), \tag{15}$$

$\tilde{S}(t)$は時間のみの任意関数，（１３・ａ）から

$$d\tilde{S}(t)/dt = -m\dot{Q}^2/2 - U + (1/2m)(\nabla R)^2 + (\hbar/2m)\triangle R, \tag{16}$$

$$\left.\begin{aligned}K_{c\ell} &= m\dot{Q}(t)^2/2,\\ \vec{u} &= \nabla R/m,\end{aligned}\right\} \tag{16・a}$$

とし，

$$d\tilde{S}(t)/dt = -E \tag{16・b}$$

により(16)は次式となる。

$$E = K_{c\ell} + U - (m/2)u^2 - (\hbar/2)\,\mathrm{div}\,\vec{u}, \tag{17}$$

ここで

$$A = \exp(R/\hbar) \tag{18}$$

による実数の確率振幅Aに戻っておくと(17)は次のようになり，

$$EA = \left\{ K_{c\ell} + U - (\hbar^2/2m)\,\triangle \right\} A, \tag{19}$$

Eを固有値とし，Aに対する固有値方程式であり，とくに $\nabla S = m\dot{Q} = 0$ の静止系に対しては通常の定常波動方程式

$$\left\{ -(\hbar^2/2m)\,\triangle + U \right\} A = EA \tag{20}$$

が成立する。Aに対して一価・連続・有限性であることを容認しておこう。量子力学的運動エネルギー演算子は，この意味でもSに由来するのではなく，Rに由来する（あるいは量子ポテンシャルに由来する）ことが知れる。

量子力学的エネルギーの期待値

$$\langle H \rangle = i\hbar \int \varphi^* \,\partial\varphi/\partial t \quad d\tau \tag{21}$$

を求めると，

$$\langle H \rangle = -\int A^2 \,(d\tilde{S}/dt)\; d\tau$$
$$= m\dot{Q}^2/2 - \langle mu^2/2 \rangle + \langle U \rangle, \tag{21・a}$$

ここに

$$-(\hbar/2)\,\langle \mathrm{div}\,\vec{u} \rangle = 0,$$

古典的運動エネルギーと拡散流の平均運動エネルギーとは $\langle H \rangle$ に対して逆方向に寄与する形になっているが，$\vec{p} = -i\hbar\nabla$ により運動量演算子を導入すると，

$$-\langle mu^2/2 \rangle = (1/2m)\,\langle \vec{p}^2 \rangle \tag{21・b}$$

量子力学的運動エネルギーであることがわかる。

〔Ⅱ〕

$$\nabla S = \nabla R\ ;\ \triangle S = \triangle R \tag{22}$$

の場合，まず（13・a）から，Newtonの運動方程式そのもの

$$m\,d\vec{v}/dt = -\nabla U, \tag{23・a}$$

がえられ，一方（13・b）からは，

$$\partial R/\partial t = -mv^2 = -2K \tag{23・b}$$

がえられる。エネルギー保存系

$$K + U = E = \mathrm{const}.$$

に対し，

$$R=-\int 2K\,dt+R' , \qquad (23\cdot c)$$

(R′ は t にはよらない積分定数)

$$=-\int(2K-E)\,dt-\int E\,dt+R'$$

$$=-\int(K-U)\,dt-\int E\,dt+R' , \qquad (23\cdot d)$$

と変形し，古典力学的軌道上の２定点Ａ，Ｂを固定し，$R'=R_A$, $R=R_B$ と書いて軌道を僅か変えるという変分に対し，

$$\delta(R_B-R_A)=0 \qquad (24)$$

を要請するとき，（23・c）は，最小作用の原理

$$\delta\int 2T\,dt=0 \qquad (24\cdot a)$$

となり，（23・d）は，Hamiltonの原理

$$\delta\int(K-U)\,dt=0 \qquad (24\cdot b)$$

となり，軌道上の線素を $d\ell$ として，$K=(m/2)(d\ell/dt)^2$ に注意すれば，Maupertuis の原理

$$\delta\int_A^B\sqrt{2m(E-U)}\,d\ell=0 \qquad (24\cdot c)$$

となる。当然のことであるのかもしれないが（23・a）と共に，（23・b)が出て，

$$-\int_A^B dR=\text{極小}$$

の作用原理が $R=\hbar\ell n\,A$ に対してのものであり，（24・a）および（24・c）が自然に出ることは興味深い。de Broglie の道を丁度逆にたどったことになるのであろう。

〔Ⅲ〕

$$\nabla R=m\vec{u}=0\ ;\quad \triangle R=0 \qquad (25)$$

の場合を考えよう。

（13・a）は次式となる。

$$\partial S/\partial t=-(1/2m)(\nabla S)^2-U , \qquad (26\cdot a)$$

また（13・b）は，

$$\partial R/\partial t=-(\hbar/2m)\triangle S$$

$$=-(\hbar/2)\ \mathrm{div}\,\vec{V} , \qquad (26\cdot b)$$

となる。まず（26・b）から，

$$R=-(\hbar/2)\int \mathrm{div}\,\vec{V}\,dt+R' , \qquad (26\cdot b')$$

R′はtにはよらない積分定数。従って，

$$A = \mathrm{const.} \cdot \exp\left(-1/2 \int \mathrm{div}\, \vec{V}\, dt\right), \tag{27}$$

である。条件(25)の下で(26・b)から，

$$\mathrm{grad}\ \mathrm{div}\, \vec{V} = 0 \tag{28}$$

であるから，(26・a)は，両辺のgradをとって再び，Newtonの運動方程式

$$m\, d\vec{v} / dt = -\nabla U \tag{29}$$

となる。この〔Ⅲ〕の場合は，高林氏が最小作用の原理からのHuygensの原理の誘導として示され，Feynman kernelを導出された場合に他ならない。[1][2]

この場合の重要性は遷移確率(非古典量)の1/2乗としてのkernelを半古典的に導出する点，及びそれによってSchrödinger方程式が再生する点にある。ここでは最小作用の原理に直接うったえることなく，Feynman kernelを導いておこう。

いま位相空間の近接した2時空点

$$(p_0, q_0, t),\ (p, q, t+\delta t)$$

に対して，(29)は次のようになる。

$$p = p_0 + \delta t\,(dp/dt) \qquad q = q_0$$

$$= p_0 - \delta t\,(\nabla U)_0, \tag{30・a}$$

これをtで積分して，(30・a)からのp_0を代入して次式がえられる。

$$mq = mq_0 + p\,\delta t + (\delta t)^2/2 \cdot (\nabla U)_0, \tag{30・b}$$

これからpを求めると，

$$p = m\,(q - q_0)/\delta t - (\delta t/2)\,(\nabla U)_0, \tag{30}$$

$p = \nabla S$であるから

$$\delta S = m\,(q-q_0)^2/2\delta t - (\delta t/2)\,(q-q_0)\,(\nabla U)_0 - U\,(q_0)\,\delta t, \tag{31}$$

これは丁度，系のLagrange関数

$$L(\dot{q}, q) = (m/2)\,\dot{q}^2 - U(q)$$

による作用関数Sのうち，最小作用の原理

$$S(q, t+\delta t; q_0, t)$$

$$= \left\{\int_t^{t+\delta t} L(\dot{q}, q)\, dt\right\}_{\min} = \delta S$$

を満すものとなっていることがわかる。

(30)から

$$\mathrm{div}\,\vec{V}=3/\delta t$$

故，(27)から，

$$A=\mathrm{const.}(\delta t)^{-3/2}, \tag{32}$$

従って，(31)及び(32)による

$$K(q,t+\delta t;q_0,t)=A\exp\{(i/\hbar)\delta S\}, \tag{33}$$

が

$$\varphi(q,t+\delta t)=\int K(q,t+\delta t;q_0,t)\times\varphi(q_0,t)\,dq_0, \tag{34}$$

を満すkernel ($\varphi(q_0,t)$, $\varphi(q,t+\delta t)$)となる。

〔IV〕

$$\nabla S=0\;;\;\Delta S=0 \tag{35}$$

の場合には，(13・a)のみが残り，小さな時間間隔 δt に対して，

$$\delta_t S=-U\delta t+(\hbar^2/2m)(\Delta A/A)\delta t, \tag{36}$$

が成立する。

これは確率振幅 $A(q,t)$ の時間推進

$$A(q,t+\delta t)=T(\delta t)A(q\cdot t) \tag{37・a}$$

を与える演算子

$$T(\delta t)=\exp(i\delta_t S/\hbar) \tag{37・b}$$

となる。微小時間間隔 δt に対し

$$T(\delta t)=1+i\delta t S/\hbar=1-(i/\hbar)U\delta t+(i\hbar/2m)(\Delta A/A)\delta t, \tag{37・c}$$

となり，(37・a)で

$$A(q,t+\delta t)=A(q,t)+\delta t\{\partial A(q,t)/\partial t\}, \tag{37・d}$$

と展開するとき，(37・a)は次式となる。

$$i\hbar\,\partial A/\partial t=-(\hbar^2/2m)\Delta A+UA, \tag{38}$$

従って，量子力学的Hamiltonian

$$H = -(\hbar^2/2m)\triangle + U$$

による時間推進演算子との同等性

$$\exp(-iH\delta t/\hbar) = \exp(i\delta_t S/\hbar)$$

が示され，このもとでのみ，(38)と(20)とは同等である。この場合は"静止系"であり，位置によるSの変化はないのであるが，量子ポテンシャルと位置エネルギー(スカラーポテンシャル)とにより，Sの時間変化が生じ，$\delta_t S = -E\delta t$によって直ちにAに対する波動方程式が生ずる。

以上により，

$$\hbar\,\ell n\ \varphi(q,t) = R(q,t) + iS(q,t)$$

としての(13・a&b)の連立偏微分方程式は，見通しの良い条件のもとで種々の力学的運動状態をもたらし，夫々の運動状態は定った軌道運動のトラジエクトリー束を与えていることがわかる。夫々の束縛条件が見通し良く設定できるという後向きの立場に立っても依然Brown 運動論による描像は有効であるといえよう。しかしながらこの段階では未だSchrödinger 方程式からの一般式(13・a&b)の周囲のどうどうめぐりに止っているとの批判は甘受しておかねばならぬ。

参考文献

(1) T.Takabayachi;Prog.Theor. Phys., 8 143(1952),
基礎科学No.25,940(1952).

(2) R.P.Feynman ; Rev. Mod.Phys.,20 ,367(1948),
"物理法則はいかにして発見されたか，"江沢訳
229頁以降(ダイヤモンド社，1968)。